



جامعة الموصل
كلية التربية للعلوم الصرفة
قسم الكيمياء

حساب ثابت التأين والمتغيرات الثيرموداينمكية لعدد من قواعد
شيف بطريقة التوصيلية الكهربائية مع دراسة الفعالية البيولوجية

آمنة إياد عبد الكريم الدباغ

رسالة ماجستير

كيمياء

بإشراف

الأستاذ المساعد

الدكتورة فداء حسن مرعي الطائي

الخلاصة

يشتمل هذا البحث على تحضير أربعة عشر مركبًا من قواعد شيف الفينولية المشتقة من الألدهيدات والكي-tonات، والتي تحتوي على المجموعة الفينولية في المواقع أورثو (o) ، ميتا (m) وبارا (p) ، تم التأكد من التراكيب الكيميائية للمركبات المحضرة باستخدام عدد من التقنيات الفيزيائية والكيميائية، شملت الكشف النوعية وقياس درجات الانصهار، أطياف الأشعة فوق البنفسجية (UV-Vis) ، أطياف الأشعة تحت الحمراء (FT-IR) واطياف الرنين النووي المغناطيسي ($^1\text{H NMR}$).

كما تم الاستدلال على وجود الأواصر الهيدروجينية في المركبات المحضرة من خلال تحليل أطياف الأشعة فوق البنفسجية والأشعة تحت الحمراء المقاسة والرنين النووي المغناطيسي.

وهدفت الدراسة بصورة رئيسية إلى تعيين ثوابت التآين للقواعد المحضرة باستخدام طريقة التوصيلية الكهربائية، التي تعد من الطرائق البسيطة والسريعة والدقيقة. وقد أظهرت النتائج أن قيم ثوابت التآين تعتمد بصورة أساسية على عدة عوامل، من أهمها: الهيئة التركيبية للحامض، ودرجة الحرارة، ونوع المذيب المستخدم، إذ تمت الدراسة في كل من مذيبي الماء والإيثانول المطلق.

قد تسهم بعض العوامل الأخرى بدرجة أقل في التأثير في قيم ثابت التآين، مثل عامل الإعاقة الفراغية وإمكانية تكوين الأواصر الهيدروجينية. وأظهرت النتائج أن عملية تآين الأحماض في مذيب الماء كانت غير تلقائية ($\Delta G +$) وماصة للحرارة ($\Delta H +$) ، ومصحوبة بنقصان في الأنتروبي ($\Delta S -$) وقد فسرت هذه النتائج بالاعتماد على القيم المحسوبة للمتغيرات الترموديناميكية المرتبطة بعملية التآين.

وأخيرًا، درست الفعالية البيولوجية، الارساء الجزيئي والسمية الخلوية لبعض المركبات المحضرة تجاه ثلاثة انواع من البكتيريا، وقد أظهرت النتائج اختلافًا في النشاط البكتيري اعتمادًا على طبيعة التركيب الكيميائي للمركبات المدروسة. وبهذا تصبح مؤهلة الى إمكانية استعمالها كمركبات واعدة في التطبيقات الدوائية المحتملة.

Abstract

This research includes the synthesis of fourteen phenolic Schiff base compounds derived from aldehydes and ketones, containing the phenolic group at the ortho (o), meta (m), and para (p) positions. The chemical structures of the synthesized compounds were confirmed using several physical and chemical techniques, including qualitative tests, melting point measurements, ultraviolet-visible spectroscopy (UV–Vis), Fourier transform infrared spectroscopy (FT–IR), and proton nuclear magnetic resonance spectroscopy (^1H NMR).

The presence of hydrogen bonding in the synthesized compounds was also inferred through the analysis of the measured UV–Vis, FT–IR, and ^1H NMR spectra.

The main objective of the study was to determine the ionization constants of the synthesized bases using the electrical conductivity method, which is considered a simple, rapid, and accurate technique. The results showed that the ionization constant values mainly depend on several factors, the most important of which are the structural configuration of the acid, temperature, and the type of solvent used, as the study was carried out in both water and absolute ethanol solvents.

Some other factors may also contribute, to a lesser extent, to influencing the ionization constant values, such as steric hindrance and the possibility of hydrogen bond formation. The results indicated that the ionization process of the acids in water solvent was non-spontaneous ($\Delta G +$), endothermic ($\Delta H +$), and accompanied by a decrease in entropy ($\Delta S -$). These findings were interpreted based on the calculated values of the thermodynamic parameters associated with the ionization process.

Finally, the biological activity, molecular docking and cytotoxicity studies of some synthesized compounds against three types of bacteria were investigated. The results showed variations in antibacterial activity depending on the nature of the chemical structure of the studied compounds. Therefore, these compounds may be considered promising candidates for potential pharmaceutical applications.

University of Mosul
College of Education
For Pure Science
Department of Chemistry



Determination of the Ionization Constant and Thermodynamic Parameters of Some Schiff Bases by Electrical Conductivity Method with Biological Activity Study

Amina Ayad Abdul- Kareem Al-dabagh

M.Sc thesis

Chemistry

Supervised by

Assist. Prof.

Dr. Fedaa Hasan Marie Al-tai

2026 A.D

1448 A.H